多相流会议论文编号：166213

口喉边界传热下吸湿性颗粒物运动与沉积模拟

陈晓乐，钟文琪*

(东南大学能源热转换及其过程测控教育部重点实验室，南京 210096)

(Tel: 025-83794744, Email: wqzhong@seu.edu.cn)

摘　要：本文构建了含呼吸道周边黏液层和组织的口喉呼吸道模型，实现了黏液层上水蒸气组分输运和对流传热、黏液层内汽化潜热和黏液层及呼吸道周边组织内的导热模拟，在 27.6ºC，相对湿度 34.7%空气入口条件下分别模拟了在 1)考虑呼吸道、黏液层及组织导热、对流和汽化潜热和 2)呼吸道壁面恒定 37ºC 两种边界条件下的理想口喉模型中多组分吸湿性颗粒物的运动和沉积。结果表明，条件 1 平均相对湿度较条件 2 高 2.3%，但颗粒物沉积率比条件 2 小，最大差异可达 9%；颗粒物沉积形式类似，但条件 1 下沉积的颗粒物平均直径比条件 2 小 40.7%，逃逸颗粒物平均直径小 14.3%。

关键词：边界传热；呼吸道；可吸入颗粒物；吸湿性；多组分

中图分类号：X503.1　　　　　　**文献标识码：A**

Numerical study of the transport and deposition of hygroscopic particles in a mouth-throat airway with heat-transfer boundary

CHEN Xiao-Le ZHONG Wen-Qi*

(Key Laboratory of Energy Thermal Conversion and Control of Ministry of Education, Southeast University, Nanjing 210096, China)

Abstract:

A mouth-throat (MT) airway model is constructed, including the airway tissue and mucus layer. It realizes the simulations of the water vapor transport above the mucus layer, calculations of the convection heat-transfer, the latent heat due to evaporation of the mucus and the heat condition within the airway tissue. The transport and deposition of multi-component hygroscopic particles are simulated at 27.6ºC and relative humidity (RH) at 34.7%. Two types boundary conditions are considered, i.e., 1) considering heat transfer, including the conduction, convection and latent heat generation in the airway, mucus layer and tissue, 2) constant temperature of the airway boundary at 37 ºC. The simulation results indicate that the average RH of condition 1 is 2.3% higher when compared to that of condition 2. However, the deposition efficiency (DE) of condition 1 is smaller, and the largest DE difference between the two conditions is up to 9%. The deposition patterns are similar when comparing the two conditions. But the average diameters of deposited and escaped particles of condition 1 are 40.7% and 14.3% smaller than that of condition 2, respectively.

Key words: heat-transfer boundary; airway; inhalable particle; hygroscopicity; multi-component

0 引言

近年来随着呼吸道内可吸入颗粒物研究的不断深入，研究者越来越关注利用可吸入颗粒物运动和沉积规律尝试实现呼吸道内药物颗粒的靶向投递，其中吸湿性颗粒物相关研究引起了较为广泛的关注。已有研究表明，通过控制吸湿性颗粒物的初始直径，使其在穿过上呼吸道时较少地发生沉积，入肺后呼吸道内湿度明显提高，颗粒物发生吸湿增长，直径和惯性发生明显提高，使颗粒物能够高效地在肺内沉积[1-3]。

由于吸湿性颗粒物的吸湿增长过程易受环境温度和湿度影响[4]，所以准确模拟呼吸道内温度、湿度条件是预测吸湿性可吸入颗粒物运动和沉积的前提条件。然而，在以往的研究中一般使用呼吸道壁面温度为 37ºC、相对湿度(Relative Humidity, RH)

收稿时间：2017-01-18

基金项目：国家自然科学基金青年基金项目(No. 51606041)；江苏省自然科学基金青年基金项目(BK20160688)

作者简介：陈晓乐(1986--)，男，讲师，博士，主要从事呼吸道内气溶胶动力学研究。通讯作者：钟文琪，教授，wqzhong@seu.edu.cn。

为 99.5%或 100%条件进行研究[5, 6]。同时目前的实验中一般采用 3D 打印和快速成型方法加工呼吸道模型，材料一般为塑料、树脂等，因此难以模仿呼吸道表面黏液输运和组织传热过程[3, 7]。但实际过程中，周围环境温度和 RH 一般低于呼吸道条件，所以在呼吸过程中，呼吸道壁面黏液层及附近组织将与空气进行传热，包括与空气的对流换热、水分蒸发所造成的气化潜热损失和组织内导热[8]。

本文构建了含有黏液层和周边人体组织的理想口喉模型，并在不同传热边界条件下模拟了吸湿性可吸入颗粒物的运动和沉积过程，即在空气 T = 27.6 ºC，RH = 34.7%入口条件下对比了 1)考虑组织内导热、黏液层表面对流和水蒸气蒸发造成的汽化潜热损失以及 2)呼吸道壁面恒定 37ºC 两种边界条件下的温度和相对湿度分布以及多组分颗粒物的沉积率和沉积形式。

1 控制方程

1.1 气相

由于口喉模型中存在横截面渐缩，流速逐渐增大，存在层流-湍流捩变和湍流流动，因此气相场流动模拟采用了 Transition SST 模型，因篇幅限制不罗列控制方程，细节可参考前人研究[9, 10]，在呼吸道内的应用可参考 Zhang 和 Kleinstreuer(2011)工作[11]。为分析水蒸气在呼吸道内的分布，采用了干空气和水蒸气两种组分，组分输运模型为[12]：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i)+\nabla\cdot(\rho\vec{v}Y_i)=-\nabla\cdot\vec{J}_i \tag{1}$$

相应能量方程为[12]：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H)+\nabla\cdot(\rho\vec{v}H)=\nabla\cdot\left(\frac{k_t}{c_p}\nabla H\right) \tag{2}$$

1.2 颗粒相

颗粒相控制方程主要包含两方面，一方面是运动方程，假设可吸入颗粒物为稀相，忽略颗粒间碰撞，其运动可由牛顿第二定律确定[13, 14]：

$$m_p\mathrm{d}\vec{u}_p/\mathrm{d}t=\vec{F}_D+m_p(\rho_p-\rho)\vec{g}/\rho_p \tag{3}$$

另一方面是颗粒物与周围流体中蒸气相互作用方程，该模型假设颗粒物表面有一厚度可忽略的薄层，薄层中气态组分浓度由颗粒物(液滴)表面组分决定。薄层内蒸气成分与周围流体中蒸气成分的传质过程中，可蒸发组分 e 的平均质量通量 $\bar{n}_e$ 为[15, 16]：

$$\bar{n}_e=\frac{\rho Sh\bar{D}_eC_m}{d_p}\ln\frac{1-Y_{e,\infty}}{1-Y_{e,surf}} \tag{4}$$

由此可以确定吸湿性颗粒物吸湿增长/蒸发[6, 15, 16]：

$$\frac{dm_p}{dt}=-\sum_{e=1}^{k}\int_{surf}n_e dA\approx-\sum_{e=1}^{k}(\bar{n}_e\cdot A) \tag{5}$$

式(4)中颗粒物表面组分 e 的质量分数 $Y_{e,surf}$ 可以由修正的 Raoult 定律得到[4, 15, 16]：

$$Y_{e,surf}=\gamma_e x_e K_e\frac{P_{ve,sat}(T_p)}{\rho R_e T_p} \tag{6}$$

1.3 固相

固相中仅为热传导过程，其控制方程为：

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h)=\nabla\cdot(k\nabla T)+S_h \tag{7}$$

其中热源项 S_h，即黏液层水蒸气蒸发所吸收的热量，仅存在代表黏液层的网格中。

根据下式可得水蒸气在黏液层上的通量：

$$\vec{J}_{wv}=-\left(\rho D_{wv,m}+\frac{\mu_t}{Sc_t}\right)\nabla Y_{wv}-D_{T,wv}\frac{\nabla T}{T} \tag{8}$$

由此，结合水蒸气气化潜热值可获得 S_h。

2 模拟对象与条件

理想口喉模型空腔部分结构与 Zhang 等(2006)[17]所提出的相同，口腔入口直径为 30mm，喉部出口为 8.5mm。Wu 等(2014)研究指出，受传热影响的呼吸道周围组织厚度约 0.5mm[8]，因此在 Zhang 等(2006)所用模型外增加了总厚度为 1mm 的黏液层-组织区域。理想口喉模型结构和网格划分示意图如图 1 所示，其中流体域采用了 Ogrid，进行了边界层加密，保证首层网格 y^+值小于 1。划分黏液层-组织区域网格时，采用了类似的加密方法，贴近流体的第一层网格厚度为 10μm，作为黏液层，其余九层网格逐渐增厚，占据 990μm，作为呼吸道周围组织。生成了网格数为 61.6 万、289.3 万和 988.5 万的三个网格，经网格无关性校验，选择网格数为 289.3 万的网格，其中流体域和黏液层-组织区域网

格数分别为228.7万和60.6万。

在模拟中假设稳态吸气流量为23.6 L/min(入口处雷诺数 $Re = 832.6$，出口处 $Re = 2938.7$)，入口处速度分布为层流的抛物面形状，假设壁面 $RH = 99.5\%$，入口空气 $T = 27.6$ ºC，$RH = 34.7\%$，首先在1)考虑导热、对流和汽化潜热和2)呼吸道壁面恒定37ºC 两种条件下开展干空气和水蒸气两种组分气体的流动模拟。

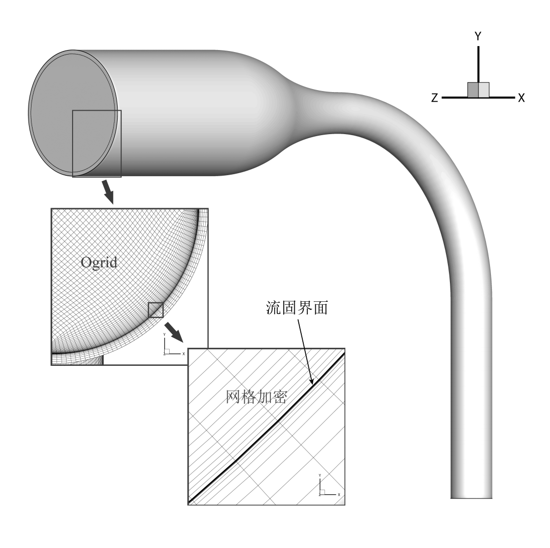


图1 理想口喉模型与网格划分示意图

Fig. 1 Idealized MT airway model and mesh

在流动模拟收敛后(残差 < 10^{-4})在稳态流场下进行吸湿性多组分颗粒物运动和沉积的模拟，颗粒物初始组分为水、酒精、NaCl和荧光剂，质量比为400：100：100：2.5，在低 *RH* 条件下，颗粒物将蒸发失去水和酒精成分，形成固体颗粒(仅含 NaCl和荧光剂，直径为初始直径的44.3%)，当颗粒物进入壁面附近的高 *RH* 区域时可能发生吸湿增长。如表1所示，每种边界条件进行8组不同颗粒物初始直径的模拟以获得颗粒物沉积率与Stokes数关系。每次颗粒物运动和沉积模拟中在入口处释放 10000个颗粒，颗粒物在入口的分布的概率密度正比于当地速度，即为抛物面型，颗粒物初始速度与流速相同。为保证颗粒物吸湿/蒸发模拟的稳定，颗粒物运动的时间步长设定为 10^{-7}s。此外，颗粒物的脉动速度[18]和湍流脉动的近壁面修正[19]由自编UDF完成。

表1 吸湿性多组分颗粒物初始直径与Stokes工况表

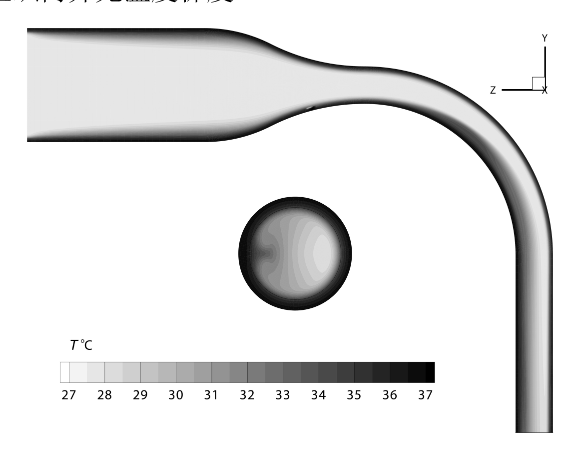
Table 1 Initial diameters and Stokes numbers of the multi-component hygroscopic particle

颗粒物直径 d_p (μm)	Stokes数
2.5	1.98E-04
5	1.24E-03
7.5	2.79E-03
10	4.96E-03
11.25	1.12E-02
12.5	1.98E-02
13.75	2.51E-02
15	3.10E-02

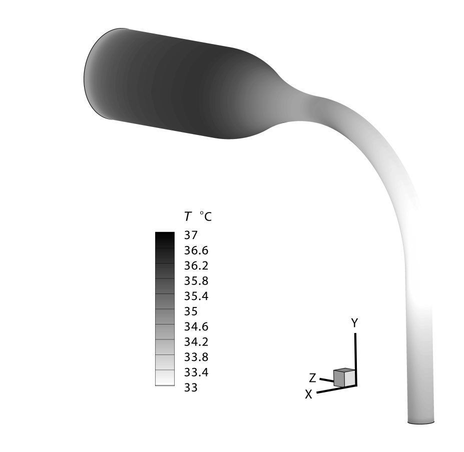
3 结果与讨论

3.1 温度与RH分布

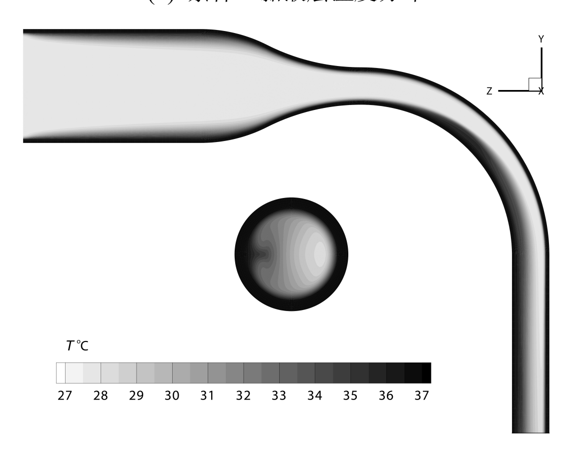
由于篇幅限制，在此不详细介绍理想口喉模型内的流场分布，细节可参见前人研究[17]。在图2给出传热边界下(条件1)和恒定壁温(条件2)中平面、出口以及黏液层中的温度分布。从整体中平面和出口温度分布来看(图 2(a))，其分布形式与速度场十分相似，但值的大小相反，这是由于进口空气温度低于呼吸道边界，管流中心速度快的空气未能充分地与呼吸道表面发生热交换。考虑呼吸道表面导热、对流和汽化潜热作用时(图 2(b))，能够明显观察到黏液层中温度的不均匀分布，在口咽附近的弯区处由于气流冲刷强化了对流换热和水蒸气蒸发，因此温度较低。在恒定壁温条件下，可以观察到壁面附近温度较条件1偏高(图 2(c))，且出口处在黏液层-组织内并无温度梯度。



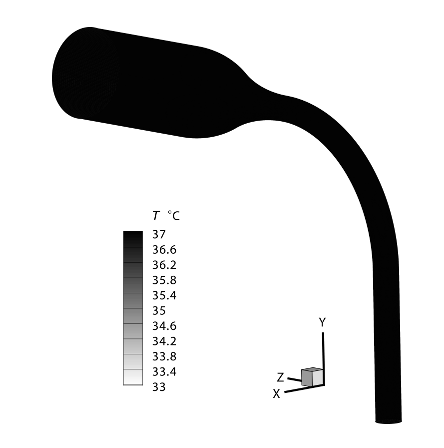
(a)条件1中平面及出口温度分布



(b) 条件 1 黏液层温度分布



(c)条件 2 中平面及出口温度分布

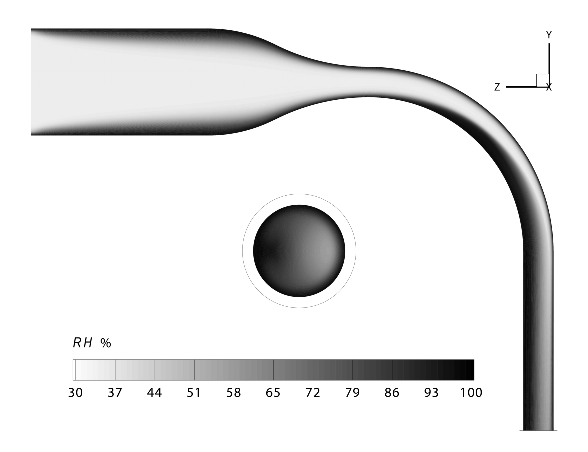


(d) 条件 2 黏液层温度分布

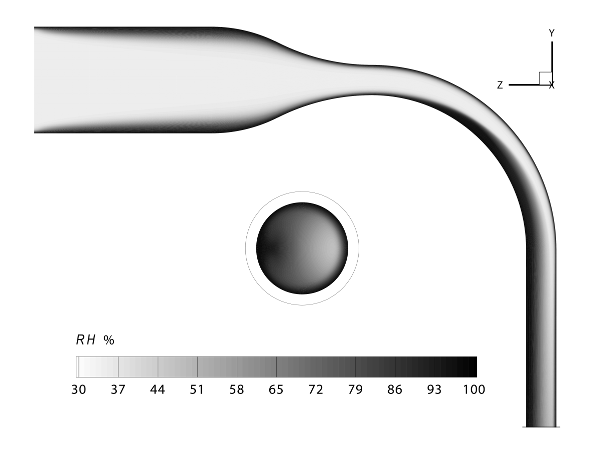
图 2 边界传热和恒定壁温条件下口喉模型内中的温度分布

Fig. 2 The temperature distributions of the MT airway for heat-transfer boundary and constant temperature boundary conditions

图 3 所示为两种条件下理想口喉模型内中平面及出口的 RH 分布，两者较为接近，但能够发现在口咽处和出口处，条件 1 下的高 RH 区域更深入地扩展到管流中部区域，对比两者在流体域内的平均 RH 可以发现条件 1 比条件 2 高 2.3%。在前期研究中已经发现，吸湿性颗粒物的增长过程对 RH 较为敏感[6]，如果扩展到整个呼吸系统，可能带来较大的吸湿性颗粒物沉积差异。



(a) 入口空气 $T = 27.6$ ℃，$RH = 34.7\%$，考虑导热、对流和汽化潜热，流体域平均 $RH = 56.9\%$



(b) 入口空气 T =27.6℃，$RH = 34.7\%$，呼吸道壁面恒定 37℃，流体域平均 $RH = 54.6\%$

图 3 不同条件下理想口喉模型内中平面及出口的 RH 分布

Fig. 3 RH distributions of the symmetrical plane and outlet of the idealized MT model for different boundary conditions

3. 2 沉积率

图 4 所示为两种条件下吸湿性颗粒物沉积率与 Stokes 数关系，可以发现在条件 1 下，流体域平均 RH 相对较高(见图 3(a))，但其沉积率仍低于条件 2 的结果(St=0.025 时，沉积率差异最大约为 9%)。这与以往在定温条件下颗粒物吸湿能力与 RH 正相关有所差异，说明吸湿性颗粒物吸湿增长/蒸发过程可能不仅与 RH 有关，还与温度有关。因此，简化恒定壁温条件可能对高估吸湿性颗粒物沉积率，同时在此条件下呼吸道内大部分区域 RH 尚低于 NaCl 吸湿增长的阈值[20, 21]，肺内高 RH 环境的模拟仍有待开展。

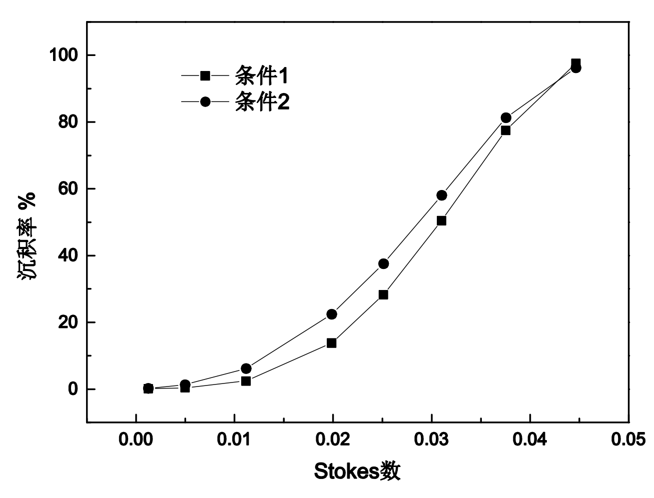
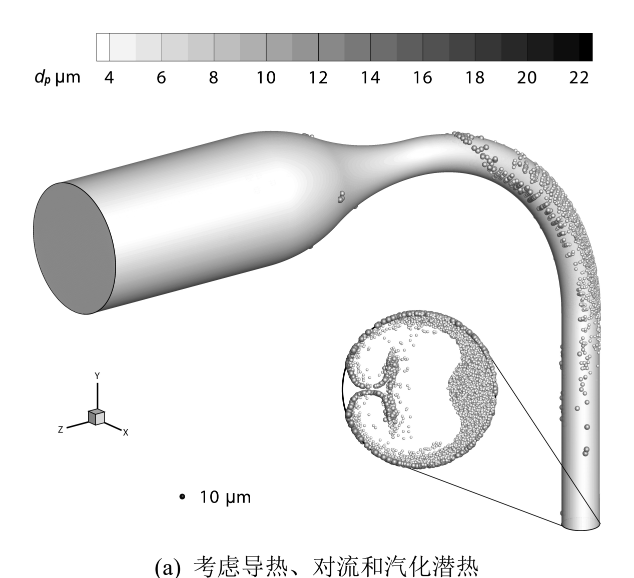


图 4 不同条件下吸湿性可吸入颗粒物沉积率与 Stokes 数关系

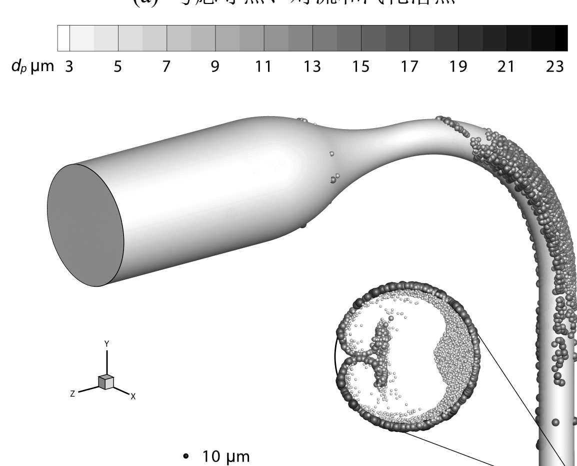
Fig. 4 Comparison of deposition efficiency of hygroscopic particles under different boundary conditions

3.3 沉积分布

图 5 所示为两种条件下初始直径 11.25μm 吸湿性颗粒物的沉积和离开出口时的分布及最终颗粒直径。由于两种条件的差异主要在温度上，所以流场以及颗粒物轨迹基本相近。可以发现，沉积的颗粒物大多集中在咽喉区域的弯曲处，同时颗粒物相对均匀的沉积在了咽喉一周，说明颗粒物一定程度上跟随了二次流的运动，而不是直接受惯性控制碰撞在后侧壁面，这应与颗粒物在入口段低 RH 区域水和酒精组分蒸发导致颗粒变小有关。同时观察出口处的颗粒物分布，发现大颗粒大多集中在壁面附近，即高 RH 区域，部分大颗粒被二次流卷吸入气管中部，其余 *RH*<70%(参考图 3)区域内颗粒物基本为干颗粒(图 5 中呈蓝色)。统计图 5 中的颗粒物直径得知条件 1 下沉积的颗粒物平均直径为 6.20μm，逃逸的颗粒物平均直径为 6.15μm，条件 2 下分别为 10.45μm 和 7.18μm。这种差异可能在流场复杂的鼻腔或更大的范围内的呼吸道内变得更加明显。



(a) 考虑导热、对流和汽化潜热



(b) 呼吸道壁面恒定 37ºC

图 5 不同条件下理想口喉模型内初始 d_p = 11.25μm 吸湿性颗粒物沉积形式和出口分布

Fig. 5 Deposition patterns and distributions at the outlet of hygroscopic droplets with initial diameter of 11.25μm in the idealized MT model under different boundary conditions

4 结论

本文构建了含有黏液层和周边人体组织的理想口喉模型，在 27.6ºC，相对湿度 34.7%空气入口条件下分别模拟了在 1)考虑呼吸道、黏液层及组织导热、对流和汽化潜热和 2)呼吸道壁面恒定 37ºC 两种边界条件下开展了多组分吸湿性可吸入颗粒物的运动和沉积模拟，对比分析了理想口喉模型内的温度和 RH 分布以及颗粒物的沉积率和沉积形式，主要结论如下：

1)当考虑了导热、对流和汽化潜热后，能够明显观察到黏液层内温度低于 37ºC 和温度的不均匀

分布；

2)条件 1 下平均 RH 较条件 2 高约 2%，但颗粒物沉积率反而较低，最大差异可达 9%，说明颗粒物的吸湿增长不仅与 RH 相关，还和温度分布有关；

3)两种条件下颗粒物沉积形式相似，但条件 2 下沉积和逃逸的颗粒物的平均直径比条件 1 分别高 40.7%和 14.3%，这一差异在复杂流场(如鼻腔)和大范围呼吸道下尚不明确，仍有待开展。

主要符号表

Nomenclature

c_p	比定压热容	m_p	颗粒质量
d_p	颗粒直径	$P_{ve,sat}(T_p)$	T_p 下的饱和压力
$D_{T,wv}$	水蒸气热扩散系数	Sc_t	Schmidt数
D_e	组分e的质量扩散率	Sh	Sherwood数
$\vec{F}_D$	颗粒曳力	$\vec{u}_p$	颗粒速度
H	气体焓	x_e	组分e在溶液中的摩尔分数
J	扩散通量	Y	气体质量分数
k	导热系数	γ_e	组分e在溶液中的活度系数
k_t	湍流热导率	μ_t	湍流动力粘度
K_e	组分e的Kelvin效应修正系数	ρ_p	颗粒密度

参考文献

[1] HINDLE M, LONGEST P W. Evaluation of enhanced condensational growth (ECG) for controlled respiratory drug delivery in a mouth-throat and upper tracheobronchial model [J]. Pharmaceutical Research, 2010, 27(9): 1800-1811.

[2] LONGEST P W, TIAN G, HINDLE M. Improving the lung delivery of nasally administered aerosols during noninvasive ventilation—an application of enhanced condensational growth (ECG) [J]. Journal of Aerosol Medicine and Pulmonary Drug Delivery, 2011, 24(2): 103-118.

[3] TIAN G, HINDLE M, LONGEST P W. Targeted lung delivery of nasally administered aerosols [J]. Aerosol Science and Technology, 2014, 48(4): 434-449.

[4] FENG Y, KLEINSTREUER C, CASTRO N, et al. Computational transport, phase change and deposition analysis of inhaled multicomponent droplet–vapor mixtures in an idealized human upper lung model [J]. Journal of Aerosol Science, 2016, 96: 96-123.

[5] ZHANG Z, KLEINSTREUER C, HYUN S. Size-change and deposition of conventional and composite cigarette smoke particles during inhalation in a subject-specific airway model [J]. Journal of Aerosol Science, 2012, 46: 34-52.

[6] FENG Y, KLEINSTREUER C, ROSTAMI A. Evaporation and condensation of multicomponent electronic cigarette droplets and conventional cigarette smoke particles in an idealized G3–G6 triple bifurcating unit [J]. Journal of Aerosol Science, 2015, 80: 58-74.

[7] GOLSHAHI L, TIAN G, AZIMI M, et al. The use of condensational growth methods for efficient drug delivery to the lungs during noninvasive ventilation high flow therapy [J]. Pharmaceutical Research, 2013, 30(11): 2917-2930.

[8] WU D, TAWHAI M H, HOFFMAN E A, et al. A numerical study of heat and water vapor transfer in mdct-based human airway models [J]. Annals of Biomedical Engineering, 2014, 42(10): 2117-2131.

[9] MENTER F R, LANGTRY R, LIKKI S, et al. A correlation-based transition model using local variables—Part I: model formulation [J]. Journal of Turbomachinery, 2006, 128(3): 413-422.

[10] MENTER F R, LANGTRY R, V LKER S. Transition modelling for general purpose CFD codes [J]. Flow, Turbulence and Combustion, 2006, 77(1-4): 277-303.

[11] ZHANG Z, KLEINSTREUER C. Laminar-to-turbulent fluid-nanoparticle dynamics simulations: Model comparisons and nanoparticle-deposition applications [J]. International Journal for Numerical Methods in Biomedical Engineering, 2011, 27(12): 1930-1950.

[12] FENG Y, KLEINSTREUER C. Micron-particle transport, interactions and deposition in triple lung-airway bifurcations using a novel modeling approach [J]. Journal of Aerosol Science, 2014, 71: 1-15.
[13] ZHANG Z, KLEINSTREUER C, KIM C. Effects of curved inlet tubes on air flow and particle deposition in bifurcating lung models [J]. Journal of Biomechanics, 2001, 34(5): 659-669.
[14] ZHANG Z, KLEINSTREUER C, KIM C. Gas–solid two-phase flow in a triple bifurcation lung airway model [J]. International Journal of Multiphase Flow, 2002, 28(6): 1021-1046.
[15] ZHANG Z, KLEINSTREUER C, KIM C S. Isotonic and hypertonic saline droplet deposition in a human upper airway model [J]. Journal of Aerosol Medicine, 2006, 19(2): 184-198.
[16] ZHANG Z, KLEINSTREUER C, FENG Y. Vapor deposition during cigarette smoke inhalation in a subject-specific human airway model [J]. Journal of Aerosol Science, 2012, 53: 40-60.
[17] ZHANG Y, CHIA T L, FINLAY W H. Experimental measurement and numerical study of particle deposition in highly idealized mouth-throat models [J]. Aerosol Science and Technology, 2006, 40(5): 361-372.
[18] GOSMAN A, LOANNIDES E. Aspects of computer simulation of liquid-fueled combustors [J]. Journal of Energy, 1983, 7(6): 482-490.
[19] WANG Y, JAMES P. On the effect of anisotropy on the turbulent dispersion and deposition of small particles [J]. International Journal of Multiphase Flow, 1999, 25(3): 551-558.
[20] CRUZ C N, PANDIS S N. Deliquescence and hygroscopic growth of mixed inorganic-organic atmospheric aerosol [J]. Environmental Science & Technology, 2000, 34(20): 4313-4319.
[21] TANG I, MUNKELWITZ H, DAVIS J. Aerosol growth studies—II. Preparation and growth measurements of monodisperse salt aerosols [J]. Journal of Aerosol Science, 1977, 8(3): 149-159.

附页

第一作者联系方式：
陈晓乐，江苏省南京市玄武区四牌楼 2 号东南大学能源与环境学院，210096
手机号码：15380897295
邮箱：xlc@seu.edu.cn